Notes on Linear Algebra

Edward Gyubeom Im*

January 31, 2023

Contents

*blog: alida.tistory.com, email: criterion.im@gmail.com

1 Linear Equation

선형방정식(Linear Equation)은 변수 $x_1, \cdots, x_n$이 있을 때 다음과 같이 작성할 수 있는 방정식을 의미한다.

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_nx_n = b \tag{1}$$

이 때, b는 계수를 의미하고 $a_1, \cdots, a_n$ 값들은 실수 또는 복소수의 미지수를 의미한다. 위 식은 다음과 같이 간결하게 작성할 수 있다.

$$\mathbf{a}^\intercal \mathbf{x} = b \tag{2}$$

이 때, $\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$ 이고 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$ 이다.

2 Linear System

선형방정식(Linear Equation)의 집합을 선형시스템(Linear System)이라고 한다. n개의 선형방정식 $\mathbf{a}_1\mathbf{x} = b_1, \cdots, \mathbf{a}_n\mathbf{x} = b_n$ 이 있는 경우 이를 다음과 같이 간결하게 선형시스템으로 표현할 수 있다.

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \tag{3}$$

3 Identity Matrix

항등행렬(Identity Matrix)는 대각성분이 전부 1이고 나머지 성분이 전부 0인 $n \times n$ 크기의 정방행렬을 의미한다. 일반적으로 $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 으로 표현한다.

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3} \tag{4}$$

항등행렬에 임의의 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$을 곱하면 자기 자신이 도출된다.

$$^\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{Ix} = \mathbf{x} \tag{5}$$

4 Inverse Matrix

정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$에 대한 역행렬(Inverse Matrix) $\mathbf{A}^{-1}$는 다음과 같이 정의된다.

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I} \tag{6}$$

2×2 크기의 정방행렬 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$가 있을 때, 역행렬은 다음과 같이 정의된다.

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \tag{7}$$

3×3 크기 이상의 정방행렬도 역행렬을 구할 수 있다. 역행렬은 정방행렬이면서 Full Rank인 행렬(= non-singular, $\det \mathbf{A} \neq 0$)에만 존재한다.

5 Solving Linear System

행렬 $\mathbf{A}$의 역행렬이 존재하는 경우 선형시스템은 역행렬을 사용하여 다음과 같이 풀 수 있다.

$$\begin{aligned} &\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \\ &\mathbf{A}^{-1}\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \\ &\mathbf{Ix} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \\ &\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \end{aligned} \tag{8}$$

그러나, **행렬 $\mathbf{A}$의 판별식 $\det \mathbf{A} = 0$인 경우 역행렬이 존재하지 않게되고 위와 같이 문제를 풀 수 없다. 이런 경우 선형시스템은 해가 존재하지 않거나 무수히 많은 해가 존재한다.**

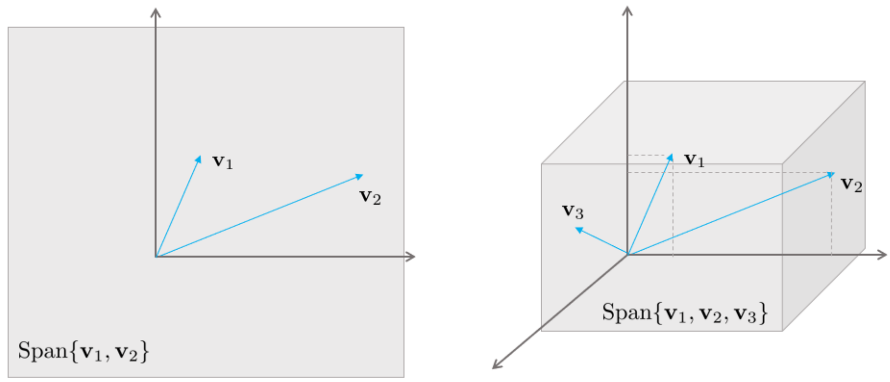
6 Linear Combination

여러 벡터 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n \in \mathbb{R}^n$이 있을 때 스칼라 값 $c_1, \cdots, c_n$에 대하여

$$c_1\mathbf{v}_1 + \cdots + c_n\mathbf{v}_n \tag{9}$$

을 벡터 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$의 가중치 계수 $c_1, \cdots, c_n$에 대한 **선형결합 (Linear Combination)**이라고 한다. 이 때 가중치 계수 $c_1, \cdots, c_n$는 0을 포함한 실수 값을 가진다.

7 Span



주어진 여러 벡터 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n \in \mathbb{R}^n$에 대해 Span$\{\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n\}$은 모든 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$에 대한 선형결합의 집합을 의미한다. 즉, Span$\{\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n\}$은 다음과 같이 쓸 수 있는 모든 벡터들의 집합이다.

$$c_1\mathbf{v}_1 + \cdots + c_n\mathbf{v}_n \tag{10}$$

이는 또한 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$에 의해 span된 $\mathbb{R}^n$ 공간 상의 subset이라고도 불린다.

8 From Matrix Equation to Vector Equation

$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$와 같은 선형 시스템을 다음과 같이 열벡터 $\mathbf{a}_i$를 기준으로 펼쳐보면

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \mathbf{b} \tag{11}$$

로 나타낼 수 있고 이를 다시 표현하면

$$\mathbf{a}_1 x_1 + \mathbf{a}_2 x_2 + \cdots + \mathbf{a}_n x_n = \mathbf{b} \tag{12}$$

와 같이 **열벡터들의 선형결합으로 표현**할 수 있게 된다. 만약 $\mathbf{b}$가 Span $\{\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n\}$에 포함되어 있다면 이들의 선형결합으로 표현할 수 있으므로 해가 존재한다. 따라서 $\mathbf{b} \in$ Span$\{\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n\}$일 때 해가 존재한다.

9 Several Perspectives about Matrix Multiplication

선형시스템 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$가 있을 때 이는 곧 $\mathbf{A}$의 열벡터들의 선형결합으로 표현할 수 있다.

$$\mathbf{Ax} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \cdots, \mathbf{a}_n] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \mathbf{a}_1 x_1 + \mathbf{a}_2 x_2 + \cdots + \mathbf{a}_n x_n = \mathbf{b} \tag{13}$$

만약 선형시스템에 전치행렬을 적용하여 $\mathbf{x}^\intercal \mathbf{A}^\intercal = \mathbf{b}^\intercal$가 되면

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n \end{bmatrix} = \mathbf{a}_1 x_1 + \mathbf{a}_2 x_2 + \cdots + \mathbf{a}_n x_n = \mathbf{b} \tag{14}$$

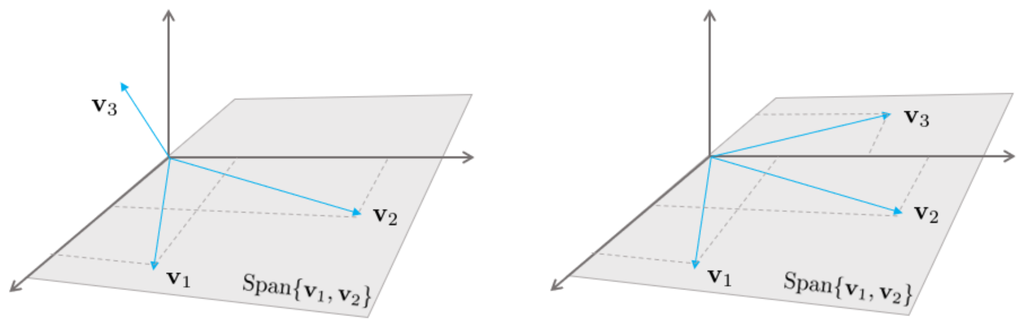
$\mathbf{b}^\intercal$는 곧 $\mathbf{A}^\intercal$의 행벡터(Row Vector)들의 선형결합으로 표현된다.

또한 두 벡터의 곱 $\mathbf{a}\mathbf{b}^\intercal = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & \cdots & b_n \end{bmatrix}$의 경우 **rank1 outer product**로 볼 수 있다. 즉, $[\mathbf{a} \ \ \mathbf{c}] \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix}$의 경우 $\mathbf{ab} + \mathbf{cd}$ 와 같이 벡터곱을 스칼라 곱과 같이 생각할 수 있다.

10 Linear Independence

벡터 집합 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n \in \mathbb{R}^n$가 주어졌을 때, 이들 중 부분 벡터들의 집합 $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_{j-1}\}$이 선형결합을 통해 특정 벡터 $\mathbf{v}_j$, $j = 1, \cdots, n$를 표현할 수 있는지 검사한다.

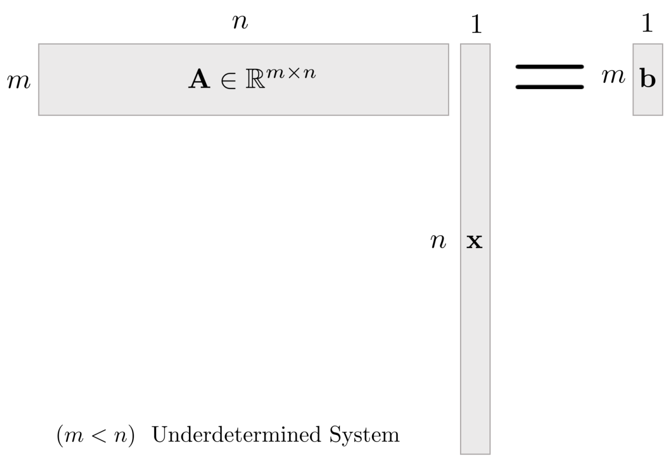
$$\mathbf{v}_j \in \mathrm{Span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_{j-1}\} \quad \text{for some } j = 1, \cdots, n? \tag{15}$$

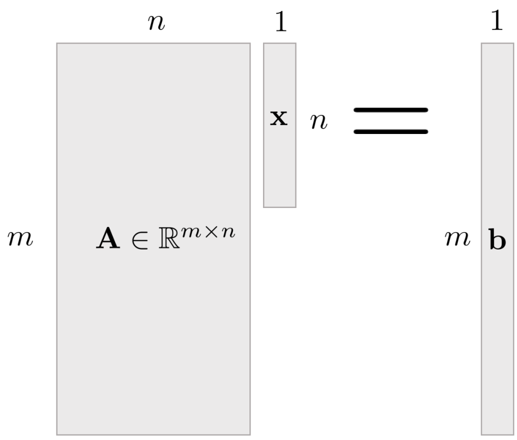


Linearly Independent
$\mathbf{v}_3 \notin \mathrm{Span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$

Linearly Dependent
$\mathbf{v}_3 \in \mathrm{Span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$

만약 $\mathbf{v}_j$가 선형결합으로 표현이 된다면 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$는 **선형의존 (Linearly Dependent)**이다. 만약, $\mathbf{v}_j$가 표현되지 않는다면 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$는 **선형독립 (Linearly Independent)**이다.





$(m > n)$ Overdetermined System

$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$와 같은 시스템에서 $\mathbf{A}$ 행렬이 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 이고 $m < n$ 인 경우 방정식의 개수보다 미지수의 개수가 많으므로 $\mathbf{A}$의 열벡터에 의해 Span되는 공간이 항상 $\mathbf{b}$의 차원보다 크게 되어 **무수히 많은 해가 존재한다. 이를 Under-determined System이라고 한다.** 반대로 $m > n$ 인 경우 미지수의 개수보다 방정식의 개수가 많으므로 **해가 존재하지 않는데 이를 Over-determined System이라고 한다.**

만약 $x_1\mathbf{v}_1 + x_2\mathbf{v}_2 + \cdots + x_n\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$ 같은 동차(homogeneous) 선형방정식이 있다고 하면

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{16}$$

과 같은 자명해가 존재한다. 이 때, $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$가 선형독립이면 자명해 이외에 해는 존재하지 않는다. 하지만, $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$가 선형의존이면 선형시스템은 자명해 이외에 다른 해가 존재한다.

자명해 이외에 다른 해가 존재하는 선형의존(Linearly Dependent) 경우 대해서 생각해보면 예를 들어 $\mathbf{A}$ 행렬이 다음과 같이 5개의 열을 가진 행렬이라고 했을 때

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 & \mathbf{a}_4 & \mathbf{a}_5 \end{bmatrix} \tag{17}$$

위 **열벡터(Column Vector)들 중 최소한 두 개 이상의 벡터가 선형결합**되어야 동차방정식 $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$의 해를 만족할 수 있다. 예를 들어 $\mathbf{a}_2 x_2$ 성분이 0이 아닌 경우 이를 다시 영벡터로 만들기 위해서는 다른 1,3,4,5 열벡터들의 선형결합이 $-\mathbf{a}_2 x_2$의 값을 만들어야 한다. 이는 곧 **$\mathbf{a}_2 x_2$ 값을 다른 열벡터들의 선형결합으로 표현할 수 있다는 말과 동치이므로 선형의존인 경우 어떤 하나의 벡터가 다른 벡터들의 선형결합으로 표현될 수 있음을 의미한다.** 이를 수식으로 표현하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_j x_j &= -\mathbf{a}_1 x_1 - \cdots - \mathbf{a}_{j-1} x_{j-1} \\ \mathbf{a}_j &= -\frac{x_1}{x_j}\mathbf{a}_1 - \cdots - \frac{x_{j-1}}{x_j}\mathbf{a}_{j-1} \in \text{Span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \cdots, \mathbf{a}_{j-1}\} \end{aligned} \tag{18}$$

11 Linear Dependence

행렬 $\mathbf{A}$의 열벡터 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \cdots, \mathbf{a}_n$이 **선형의존(Linearly Dependent)인 경우 해당 열벡터들은 Span의 차원을 늘리지 않는다.** 만약 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3\times3}$이고 $\mathbf{a}_3 \in \text{Span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$인 경우

$$\text{Span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\} = \text{Span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\} \tag{19}$$

만약 $\mathbf{a}_3 = d_1\mathbf{a}_1 + d_2\mathbf{a}_2$와 같이 선형결합으로 표현이 가능한 경우, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$는 다음과 같이 작성할 수 있다.

$$c_1\mathbf{a}_1 + c_2\mathbf{a}_2 + c_3\mathbf{a}_3 = (c_1 + d_1)\mathbf{a}_1 + (c_1 + d_1)\mathbf{a}_2 \tag{20}$$

12 Span and Subspace

$\mathbb{R}^n$ 공간의 부분공간(Subspace) H는 **$\mathbb{R}^n$의 부분집합들의 선형결합에 대해 닫혀 있는 공간을 의미한다.** 즉, 두 벡터 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in H$일 때, 어떠한 스칼라 값 c, d에 대하여 $c\mathbf{u}_1 + d\mathbf{u}_2 \in H$일 때 H를 부분공간이라고 한다.

Span $\{\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n\}$으로 형성된 공간은 항상 부분공간이다. 만약 $\mathbf{u}_1 = x_1\mathbf{a}_1 + \cdots + x_n\mathbf{a}_n$이고 $\mathbf{u}_2 = y_1\mathbf{a}_1 + \cdots + y_n\mathbf{a}_n$일 때

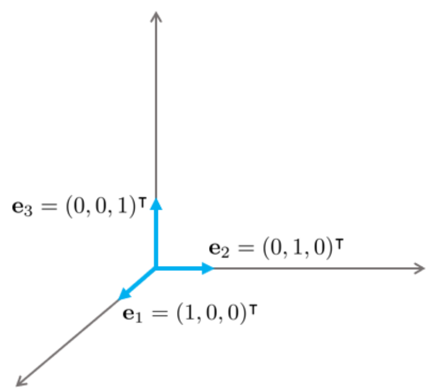
$$\begin{aligned} c\mathbf{u}_1 + d\mathbf{u}_2 &= c(x_1\mathbf{a}_1 + \cdots + x_n\mathbf{a}_n) + d(y_1\mathbf{a}_1 + \cdots + x_n\mathbf{a}_n) \\ &= (cx_1 + dy_1)\mathbf{a}_1 + \cdots + (cx_n + dy_n)\mathbf{a}_n \end{aligned} \tag{21}$$

과 같이 선형결합으로 나타낼 수 있고 이는 임의의 값 c, d에 대해서 닫혀 있음을 의미한다. 따라서 부분공간은 항상 Span $\{\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n\}$으로 표현된다.

13 Basis of a Subspace

부분공간 H의 **기저(basis)**는 다음을 만족하는 벡터들의 집합을 의미한다.

1. 부분공간 H를 모두 Span할 수 있어야 한다.
2. 벡터들 간 선형독립이어야 한다.



3차원 공간 $\mathbb{R}^3$ 의 경우 기저벡터는 3개가 존재하고 $\mathbf{e}_1 = [1\ 0\ 0]^\intercal, \mathbf{e}_2 = [0\ 1\ 0]^\intercal, \mathbf{e}_3 = [0\ 0\ 1]^\intercal$일 때, 이를 **표준기저벡터(Standard Basis Vector)라고 한다.**

14 Dimension of Subspace

하나의 부분공간 H를 표현할 수 있는 기저는 유일하지 않다. 하지만 여러개의 기저를 통해서 표현할 수 있는 부분공간의 차원(Dimension)은 유일하다. **부분공간의 차원은 기저벡터의 개수와 동일하다.**

15 Column Space of Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{array}{ccc} \mathbf{a}_{1,col} & \mathbf{a}_{i,col} & \mathbf{a}_{m,col} \\ \left[\begin{matrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{matrix}\right. & \begin{matrix} \cdots \\ \ddots \\ \cdots \end{matrix} & \left.\begin{matrix} a_{1m} \\ \vdots \\ a_{nm} \end{matrix}\right] \end{array} \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad \text{Col } \mathbf{A} = \text{Span}\{\mathbf{a}_{1,col}, \mathbf{a}_{i,col}, \mathbf{a}_{m,col}\}$$

행렬 $\mathbf{A}$의 열공간(Column Space)이란 $\mathbf{A}$의 열벡터로 인해 Span된 부분공간을 의미한다. 일반적으로 Col $\mathbf{A}$ 라고 표기한다.

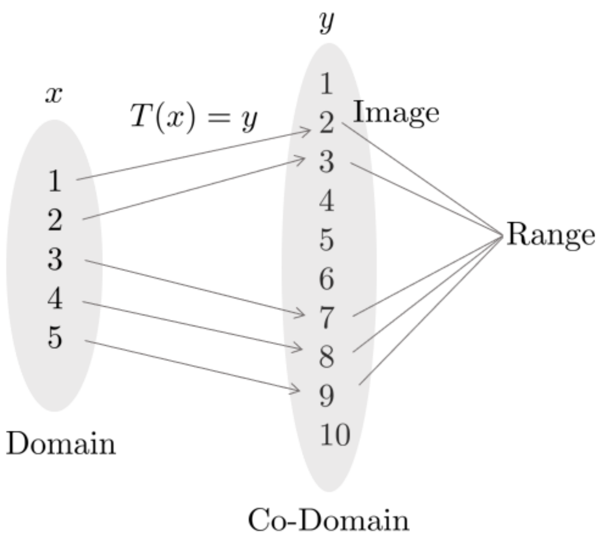
$$\text{Col}\mathbf{A} = \text{Span}\{\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}\} \tag{22}$$

16 Rank of Matrix

행렬 $\mathbf{A}$의 rank란 $\mathbf{A}$의 열벡터들의 차원을 의미한다.

$$\text{rank}\mathbf{A} = \dim \text{Col}\mathbf{A} \tag{23}$$

17 Transformation



변환(Transformation), 함수(Function), 매핑(Mapping) T 은 입력 x를 출력 y로 매핑해주는 것을 의미한다.

$$T : x \mapsto y \tag{24}$$

이 때 입력 x에 의해 매핑되는 출력 y는 유일하게 결정된다. **Domain**(정의역)이란 입력 x 의 모든 가능한 집합을 의미한다. **Co-Domain**(공역)이란 출력 y의 모든 가능한 집합을 의미한다. **Image**란 주어진 입력 x에 대해 매핑된 출력 y를 의미한다. **Range**(치역)란 Domain내에 있는 입력 x들에 의해 매핑된 모든 출력 y의 집합을 의미한다.

18 Linear Transformation

변환 T는 다음과 같은 경우에 선형변환(Linear Transformation)이라고 한다.

$$\begin{aligned} & T(c\mathbf{u} + d\mathbf{v}) = cT(\mathbf{u}) + vT(\mathbf{v}) \\ & \text{for all } \mathbf{u}, \mathbf{v} \ \text{ in the domain of T and for all scalars c and d.} \end{aligned} \tag{25}$$

19 Transformations between Vectors

$T : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mapsto \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$은 n차원의 벡터를 m차원의 벡터로 매핑하는 연산을 의미한다. 예를 들면

$$\begin{aligned} & T : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbf{y} \in \mathbb{R}^2 \\ & \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbf{y} = T(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2 \end{aligned} \tag{26}$$

20 Matrix of Linear Transformation

변환 $T : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$을 선형변환이라고 가정하면 T는 항상 행렬과 벡터의 곱으로 표현할 수 있다. 즉,

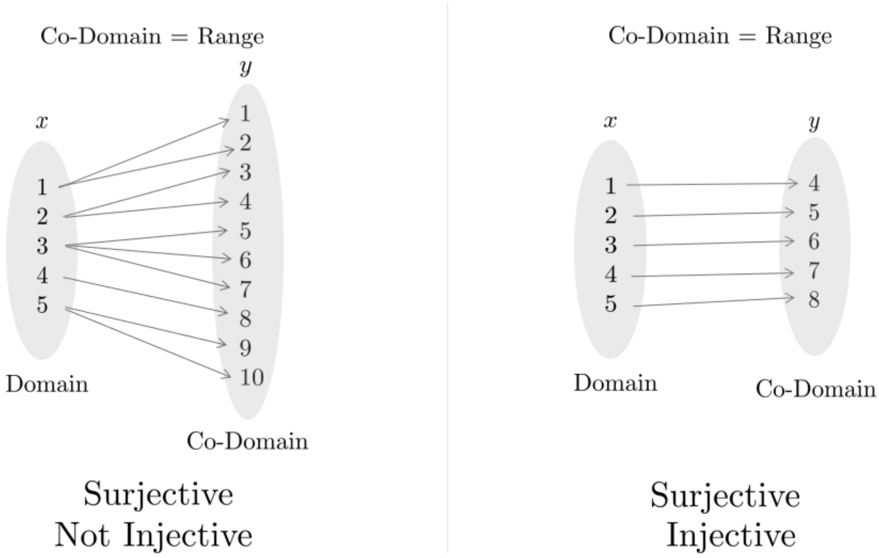
$$T(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} \ \text{ for all } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \tag{27}$$

행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$인 경우 $\mathbf{A}$의 j번째 열 $\mathbf{a}_j$는 벡터 $T(\mathbf{e}_j)$와 같다. 이 때 $\mathbf{e}_j$는 항등행렬 $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n\times n}$의 j번째 열벡터이다.

$$\mathbf{A} = [T(\mathbf{e}_1) \ \cdots \ T(\mathbf{e}_n)] \tag{28}$$

이러한 행렬 $\mathbf{A}$를 선형변환 T의 표준행렬(Standard Matrix)이라고 부른다.

21 Onto and One-To-One



Onto는 **전사함수(Surjective)라고도 불리며 공역이 치역과 같은 경우를 의미한다.** 이는 Co-Domain의 모든 원소들이 사영된 것을 의미한다.

$$\text{Surjective: Co-Domain} = \text{Range} \tag{29}$$

One-To-One은 **일대일함수(Injective)라고도 불리며 정의역의 원소와 공역의 원소가 하나씩 대응되는 함수를 의미한다.**

22 Least Square

최소제곱법(Least Square)는 **방정식의 개수가 미지수의 개수보다 많은 Over-determined 선형시스템에서 사용하는 방법 중 하나이다.** Over-determined 선형시스템 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$의 경우 일반적으로 해가 존재하지 않는다. 이런 경우 일반적으로 $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2$가 최소가 되는 근사해를 구할 수 있다.

23 Inner Product

벡터 $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$에 대해 이를 각각 $n \times 1$의 행렬로 생각할 수 있다. 그렇다면 $\mathbf{u}^\intercal$는 $1 \times n$의 행렬로 볼 수 있고 행렬곱 $\mathbf{u}^\intercal\mathbf{v}$는 1×1의 행렬이 된다. 그리고 1×1 행렬은 스칼라값으로 표시할 수 있다.

이 때, $\mathbf{u}^\intercal\mathbf{v}$에 의해 계산된 값을 $\mathbf{u}, \mathbf{v}$의 내적(Inner Product, Dot Product)라고 한다. 이는 $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$로 표기할 수 있다.

24 Properties of Inner Product

벡터 $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$이고 c를 스칼라 값이라고 할 때 내적은 다음과 같은 성질을 만족한다.

1. $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}$
2. $(\mathbf{u} + \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}$

3. $(c\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} = c(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{u} \cdot (c\mathbf{v})$
4. $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \geq 0$ and $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = 0$ iff $\mathbf{u} = 0$

위에서 2,3번 성질을 조합하면 다음과 같은 법칙을 만들 수 있다.

$$(c_1\mathbf{u}_1 + \cdots + c_n\mathbf{u}_n) \cdot \mathbf{w} = c_1(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{w}) + \cdots + c_n(\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{w}) \tag{30}$$

위를 통해 **내적이라는 연산은 선형변환이라는 것을 알 수 있다.**

25 Vector Norm

벡터 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$에 대해 벡터의 놈(Norm)은 0이 아닌 $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}$로 표기하며 벡터의 길이를 의미한다.

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \cdots + v_n^2} \tag{31}$$

2차원 벡터 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$가 있을 때 $\mathbf{v} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$라고 하면 $\|v\|$는 원점으로부터 $\mathbf{v}$ 좌표까지의 거리가 된다.

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{a^2 + b^2} \tag{32}$$

모든 스칼라 값 c에 대해 $c\mathbf{v}$의 길이는 $\mathbf{v}$의 길이를 $|c|$ 배 한 것을 의미한다.

$$\|c\mathbf{v}\| = |c| \, \|\mathbf{v}\| \tag{33}$$

26 Unit Vector

길이가 1인 벡터를 단위벡터(Unit Vector)라고 한다. 벡터의 길이를 1로 맞추는 작업을 정규화(Normalization)라고 하는데 주어진 벡터 $\mathbf{v}$가 있을 때 단위벡터 $\mathbf{u} = \frac{1}{\|\mathbf{v}\|}\mathbf{v}$가 된다. $\mathbf{u}$ 벡터는 $\mathbf{v}$ 벡터와 방향은 같지만 크기가 1인 벡터이다.

27 Distance between Vectors in $\mathbb{R}^n$

두 벡터 $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$이 있을 때 두 벡터의 거리는 dist($\mathbf{u}, \mathbf{v}$)로 나타내며 이는 $\mathbf{u} - \mathbf{v}$ 벡터의 길이를 의미한다.

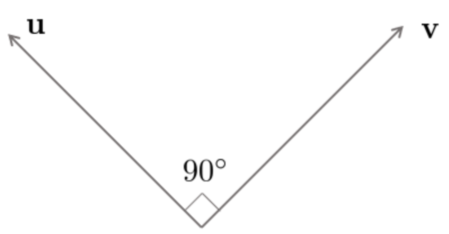
$$dist(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| \tag{34}$$

28 Inner Product and Angle between Vectors

두 벡터 $\mathbf{u}, \mathbf{v}$의 내적은 다음과 같이 놈과 각도를 통해 표현할 수 있다.

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \|\mathbf{u}\|\|\mathbf{v}\| \cos\theta \tag{35}$$

29 Orthogonal Vectors



$$\mathbf{u} \perp \mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$$

두 벡터 $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$가 있을 때 둘이 수직이려면 두 벡터의 내적이 0이어야 한다.

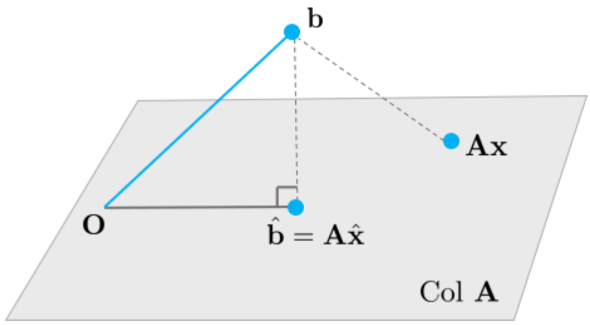
$$\mathbf{u}\cdot\mathbf{v} = \|\mathbf{u}\|\|\mathbf{v}\|\cos\theta = 0 \tag{36}$$

0이 아닌 두 벡터 $\mathbf{u},\mathbf{v}$의 내적이 0이려면 $\cos\theta$ 값이 0이어야 하고 $\theta = 90°$ 일 때 $\cos\theta$ 값은 0이 된다.

30 Least Square Problem

$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, m \ll n$과 같이 주어진 Over-Determined 시스템 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$가 있을 때 에러의 제곱합 $\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|$을 최소화하는 최적의 모델 파라미터를 찾는 것이 목적이 된다. 이 때 최소제곱법의 근사해 $\hat{\mathbf{x}}$는 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\| \tag{37}$$



$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}}$$

최소제곱법의 중요한 포인트 중 하나는 어떤 $\mathbf{x}$ 파라미터를 선정하던지 벡터 $\mathbf{Ax}$는 반드시 Col $\mathbf{A}$ 안에 위치한다는 것이다. 따라서 **최소제곱법은 Col A와 b의 거리가 최소가 되는 x를 찾는 문제가 된다.**

$\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}$를 만족하는 근사해 $\hat{\mathbf{x}}$는 Col $\mathbf{A}$에서 $\mathbf{b}$ 벡터와 가장 가까운 모든 포인트들의 집합을 의미한다. 따라서 $\mathbf{b}$는 다른 어떤 $\mathbf{Ax}$보다도 $\hat{\mathbf{b}}$와 가장 가깝게 된다. 기하학적으로 이를 만족하기 위해서는 벡터 $\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}$가 Col $\mathbf{A}$와 수직이어야 한다.

$$\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} \perp (x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + \cdots + x_n\mathbf{a}_n) \quad \text{for any vector } \mathbf{x}. \tag{38}$$

이는 곧 다음과 동일하다.

$$\begin{aligned} &(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) \perp \mathbf{a}_1 \rightarrow \mathbf{a}_1^{\intercal}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) \\ &(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) \perp \mathbf{a}_2 \rightarrow \mathbf{a}_2^{\intercal}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) \\ &(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) \perp \mathbf{a}_3 \rightarrow \mathbf{a}_3^{\intercal}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) \\ &\therefore \mathbf{A}^{\intercal}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}) = 0 \end{aligned} \tag{39}$$

31 Normal Equation

$\mathbf{Ax} \simeq \mathbf{b}$를 만족하는 최소제곱법의 근사해는 다음과 같다.

$$\mathbf{A}^{\intercal}\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^{\intercal}\mathbf{b} \tag{40}$$

위 식을 **정규방정식(Normal Equation)**이라고 부른다. 이는 $\mathbf{C} = \mathbf{A}^{\intercal}\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \mathbf{d} = \mathbf{A}^{\intercal}\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$일 때 $\mathbf{Cx} = \mathbf{d}$와 같은 선형시스템으로 생각할 수 있다. 이 선형시스템의 해를 구하면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^{\intercal}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\intercal}\mathbf{b} \tag{41}$$

32 Another Derivation of Normal Equation

근사해 $\hat{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\| = \arg\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2$와 같이 제곱을 최소화하는 문제로 표현해도 동일한 문제가 된다.

$$\arg\min_{\mathbf{x}} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})^\intercal(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) = \mathbf{b}^\intercal\mathbf{b} - \mathbf{x}^\intercal\mathbf{A}^\intercal\mathbf{b} - \mathbf{b}^\intercal\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}^\intercal\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}\mathbf{x} \tag{42}$$

위 식을 $\mathbf{x}$에 대해서 미분하고 정리하면 다음과 같다.

$$-\mathbf{A}^\intercal\mathbf{b} - \mathbf{A}^\intercal\mathbf{b} + 2\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}\mathbf{x} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\intercal\mathbf{b} \tag{43}$$

이 때 $\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$가 역행렬이 존재한다면 다음과 같이 해를 구할 수 있다.

$$\mathbf{x} = (\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\intercal\mathbf{b} \tag{44}$$

33 What If $\mathbf{C} = \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$ is NOT Invertible?

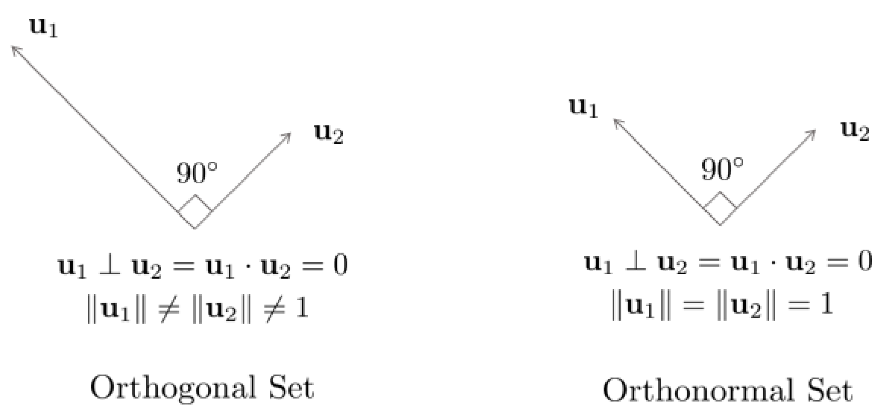
행렬 $\mathbf{C} = \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$의 역행렬이 존재하지 않는 경우 시스템은 해가 없거나 무수히 많은 해를 가지고 있다. 하지만 정규방정식은 항상 해를 가지고 있으므로 해가 없는 상황은 존재하지 않고 실제로는 무수히 많은 해를 가지고 있다. $\mathbf{C}$가 역행렬을 구할 수 없는 경우는 오직 Col $\mathbf{A}$가 선형의존일 경우에 발생한다. 하지만, **일반적으로 $\mathbf{C}$는 대부분의 경우 역행렬이 존재한다.**

34 Orthogonal Projection Perspective

행렬 $\mathbf{C} = \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$가 있을 때 $\mathbf{b}$ 점에서 Col $\mathbf{A}$ 공간으로 프로젝션하면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{b}} = f(\mathbf{b}) = \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\intercal\mathbf{b} \tag{45}$$

35 Orthogonal and Orthonormal Sets



벡터들의 집합 $\mathbf{u}_1, \cdots, \mathbf{u}_n \in \mathbb{R}^n$가 있을 때 모든 벡터 쌍들이 $\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j = 0, \quad i \neq j$를 만족하면 해당 집합은 **직교(Orhogonal)**하다고 말한다.

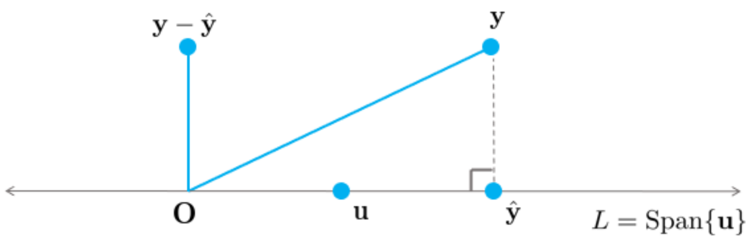
벡터들의 집합 $\mathbf{u}_1, \cdots, \mathbf{u}_n \in \mathbb{R}^n$가 있을 때 모든 직교 집합들이 단위벡터인 경우 **정규직교(Orthonormal)**하다고 말한다.

직교벡터와 정규직교벡터의 집합은 **항상 선형독립이다.**

36 Orthogonal and Orthonormal Basis

기저벡터 $\mathbf{u}_1, \cdots, \mathbf{u}_n$이 p차원의 부분공간 $W \in \mathbb{R}^n$에 있다고 할때 Gram-Schmidt 프로세스와 QR decomposition을 사용하면 직교기저벡터를 만들 수 있다. 부분공간 W에 대해 직교기저 벡터 $\mathbf{u}_1, \cdots \mathbf{u}_n$이 주어져 있다고 했을 때 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$을 부분공간 W 위로 프로젝션시킨다.

37 Orthogonal Projection $\hat{\mathbf{y}}$ of $\mathbf{y}$ onto Line



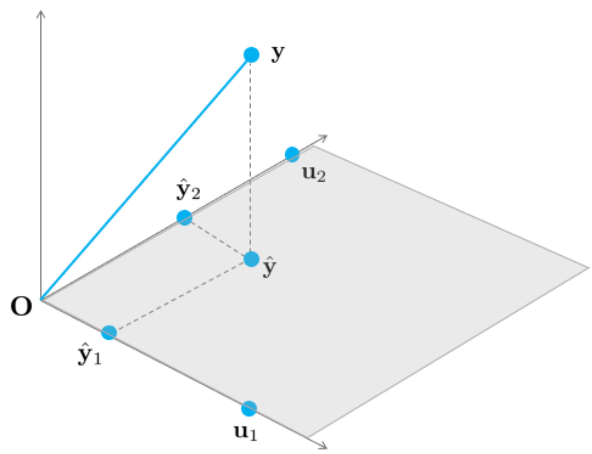
1차원 부분공간 $L = \text{Span}\{\mathbf{u}\}$ 위로 $\mathbf{y}$를 프로젝션하여 $\hat{\mathbf{y}}$를 구하면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{proj}_L\mathbf{y} = \frac{\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}}{\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}}\mathbf{u} \tag{46}$$

가 된다. 만약 $\mathbf{u}$가 단위벡터이면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{proj}_L\mathbf{y} = (\mathbf{y}\cdot\mathbf{u})\mathbf{u} \tag{47}$$

38 Orthogonal Projection $\hat{\mathbf{y}}$ of $\mathbf{y}$ onto Plane



2차원 부분공간 $W = \text{Span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\}$ 위로 $\mathbf{y}$를 프로젝션하여 $\hat{\mathbf{y}}$를 구하면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{proj}_L\mathbf{y} = \frac{\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1}\mathbf{u}_1 + \frac{\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}_2}{\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2}\mathbf{u}_2 \tag{48}$$

만약 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$가 단위벡터이면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{proj}_L\mathbf{y} = (\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}_1)\mathbf{u}_1 + (\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}_2)\mathbf{u}_2 \tag{49}$$

프로젝션은 각각 직교기저벡터에 독립적으로 적용된다.

39 Orthogonal Projection when $\mathbf{y} \in W$

만약 2차원 부분공간 $W = \text{Span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\}$에 $\mathbf{y}$가 포함되어 있다고 하면 프로젝션된 벡터 $\hat{\mathbf{y}}$는 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{proj}_L\mathbf{y} = \mathbf{y} = \frac{\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1}\mathbf{u}_1 + \frac{\mathbf{y}\cdot\mathbf{u}_2}{\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2}\mathbf{u}_2 \tag{50}$$

만약 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$가 단위벡터이면 다음과 같다.

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{proj}_L \mathbf{y} = \mathbf{y} = (\mathbf{y} \cdot \mathbf{u}_1)\mathbf{u}_1 + (\mathbf{y} \cdot \mathbf{u}_2)\mathbf{u}_2 \tag{51}$$

해는 $\mathbf{y}$가 부분공간 W에 포함되어 있지 않은 경우와 동일하다.

40 Transformation: Orthogonal Projection

부분공간 W의 정규직교기저벡터 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$가 있고 $\mathbf{b}$를 부분공간 W에 프로젝션시킨 점 $\hat{\mathbf{b}}$의 변환을 생각해보면

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{b}} &= f(\mathbf{b}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{u}_1)\mathbf{u}_1 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{u}_2)\mathbf{u}_2 \\
&= (\mathbf{u}_1^\intercal \mathbf{b})\mathbf{u}_1 + (\mathbf{u}_2^\intercal \mathbf{b})\mathbf{u}_2 \\
&= \mathbf{u}_1(\mathbf{u}_1^\intercal \mathbf{b}) + \mathbf{u}_2(\mathbf{u}_2^\intercal \mathbf{b}) \\
&= (\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^\intercal)\mathbf{b} + (\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^\intercal)\mathbf{b} \\
&= (\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^\intercal + \mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^\intercal)\mathbf{b} \\
&= [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\intercal \\ \mathbf{u}_2^\intercal \end{bmatrix} \mathbf{b} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\intercal \mathbf{b} \Rightarrow \text{ Linear Transformation!}
\end{aligned} \tag{52}$$

41 Orthogonal Projection Perspective

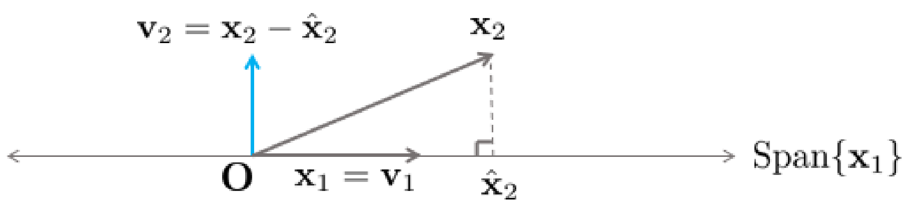
정규직교인 열벡터를 가지는 행렬 $\mathbf{A} = \mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2]$가 있을 때 $\mathbf{b}$ 벡터를 Col $\mathbf{A}$ 공간으로 정사영시키는 경우

$$\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^\intercal \mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{b} = f(\mathbf{b}) \tag{53}$$

행렬 $\mathbf{C} = \mathbf{A}^\intercal \mathbf{A}$는 $\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\intercal \\ \mathbf{u}_2^\intercal \end{bmatrix} [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2] = \mathbf{I}$와 같은 성질을 지니게 되고 따라서 다음과 같은 공식이 성립한다.

$$\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^\intercal \mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{b} = \mathbf{A}(\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{b} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\intercal \mathbf{b} \tag{54}$$

42 Gram-Schmidt Orthogonalization



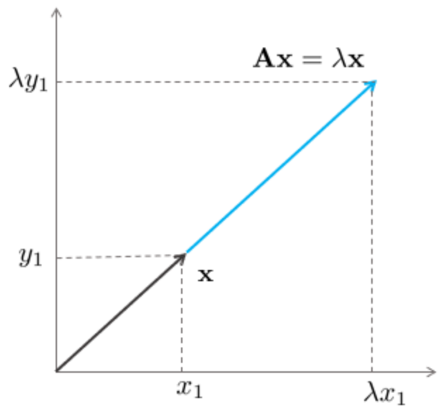
벡터 $\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$로 인해 Span되는 부분공간 $Wx_1 = \text{Span}[\mathbf{x} \ \mathbf{x}_2]$가 있을 때 두 벡터의 내적 $\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2 = 15 \neq 0$이므로 두 벡터는 수직이 아니다.

이 때 벡터 $\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1$이라고 하고 $\mathbf{v}_2$를 $\mathbf{x}_1$에 수직인 $\mathbf{x}_2$의 성분이라고 했을 때

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_1}{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1}\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} - \frac{15}{45}\begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{55}$$

가 된다. 이 때 벡터 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$는 부분공간 W의 직교기저벡터가 된다.

43 Eigenvectors and Eigenvalues



정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$에 대한 고유벡터(eigenvector)는 $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$를 만족하는 0이 아닌 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$을 말한다. 이 때 λ는 행렬 $\mathbf{A}$의 고유값(eigenvalue)이라고 한다.

$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$는 다음과 같이 다시 나타낼 수 있다.

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = 0 \tag{56}$$

이 때, 위 시스템이 $\mathbf{x}$가 0이 아닌 비자명해를 가지고 있는 경우에만 λ 값이 행렬 $\mathbf{A}$에 대한 고유값이 된다. 위와 같은 동차 선형시스템이 비자명해를 가지기 위해서는 $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$가 선형의존(Linearly Dependent)해야 무수히 많은 해를 가진다.

44 Null Space

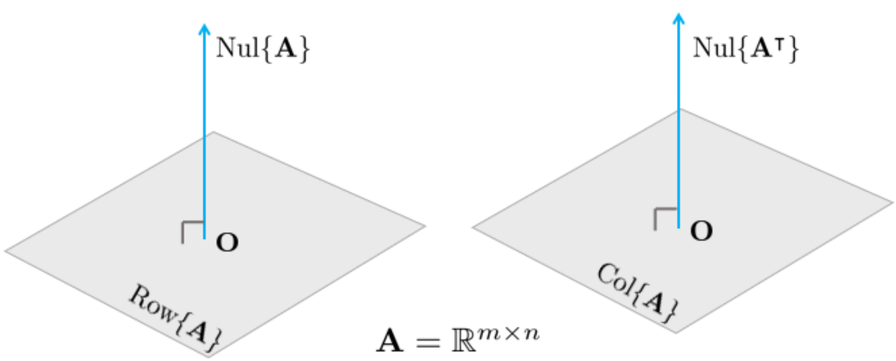
행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$의 동차 선형시스템(Homogeneous Linear System) $\mathbf{Ax} = 0$의 해 집합을 영공간(Null Space)라고 한다. Nul $\mathbf{A}$로 표기한다.

$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^\intercal \\ \mathbf{a}_2^\intercal \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^\intercal \end{bmatrix}$ 일 때 벡터 $\mathbf{x}$는 다음을 만족해야 한다.

$$\mathbf{a}_1^\intercal\mathbf{x} = \mathbf{a}_2\mathbf{x} = \cdots = \mathbf{a}_m^\intercal\mathbf{x} = 0 \tag{57}$$

즉, $\mathbf{x}$는 모든 $\mathbf{A}$의 행벡터(Row Vector)과 직교해야 한다.

45 Orthogonal Complement



벡터 $\mathbf{z}$가 부분공간 $W \in \mathbb{R}^n$의 모든 벡터와 직교하면 $\mathbf{z}$는 부분공간 W와 직교한다고 말할 수 있다. 부분공간 W와 직교하는 모든 벡터 $\mathbf{z}$의 집합을 직교여공간(Orthogonal Complement)라고 부르며 $W^\perp$로 표시한다.

부분공간 W의 직교여공간 $W^{\perp}$에 위치한 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$는 부분공간 W를 Span하는 모든 벡터들과 직교한다.

$$\begin{aligned} & W^{\perp} \quad \text{is a subspace of} \quad \mathbb{R}^n. \\ & \text{Nul}\mathbf{A} = (\text{Row}\mathbf{A})^{\perp} \\ & \text{Nul}\mathbf{A}^{\intercal} = (\text{Col}\mathbf{A})^{\perp} \end{aligned} \tag{58}$$

46 Characteristic Equation

방정식 $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = 0$이 비자명해를 갖기 위해서는 $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$ 행렬이 선형의존이어야 하고 이는 곧 역행렬이 존재하지 않아야 하는 것과 동치(Equivalent)이다. 만약 $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$이 역행렬이 존재한다면 $\mathbf{x}$는 자명해 이외에는 갖지 못한다.

$$\begin{aligned} & (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1}0 \\ & \mathbf{x} = 0 \end{aligned} \tag{59}$$

따라서 행렬 $\mathbf{A}$에 대하여 고유값과 고유벡터가 존재하기 위해서는 다음의 방정식이 항상 성립해야 한다.

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0 \tag{60}$$

위 방정식을 행렬 $\mathbf{A}$의 특성방정식(Characteristic Equation)이라고 부른다.

47 Eigenspace

$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{x})\mathbf{x} = 0$에서 $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{x})$의 영공간(Null Space)를 고유값 λ에 대한 고유공간(Eigenspace)라고 한다. λ에 대한 고유공간의 차원이 1 이상인 경우, 고유공간 내에 있는 모든 벡터들에 대하여 다음이 성립한다.

$$T(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \tag{61}$$

48 Diagonalization

정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$이 주어졌고 $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$이고 $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n\times n}$일 때

$$\mathbf{D} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V} \tag{62}$$

위와 같은 공식이 성립한다면 **이를 정방행렬 A의 대각화(Diagonalization)라고 한다.** 대각화는 모든 경우에 대해서 항상 가능한 것은 아니다. 행렬 $\mathbf{A}$가 대각화되기 위해서는 역행렬이 존재하는 행렬 $\mathbf{V}$가 존재해야 한다. 행렬 $\mathbf{V}$가 역행렬이 존재하기 위해서는 $\mathbf{V}$는 **행렬 A와 같은 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 크기의 정방행렬이어야 하고 n개의 선형독립인 열벡터를 가지고 있어야 한다.** 이 때, $\mathbf{V}$의 각 열은 행렬 $\mathbf{A}$의 고유벡터가 된다. 만약 행렬 $\mathbf{V}$가 존재하는 경우 행렬 $\mathbf{A}$는 **대각화 가능(Diangonalizable)하다**고 한다.

49 Finding V and D

대각화 공식은 다음과 같이 다시 작성할 수 있다.

$$\mathbf{D} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V} \Rightarrow \mathbf{V}\mathbf{D} = \mathbf{A}\mathbf{V} \tag{63}$$

이 때, $\mathbf{V} = \begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix}$이고 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}$이라고 하면

$$
\begin{aligned}
\mathbf{AV} &= \mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{A}\mathbf{v}_1 & \mathbf{A}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{A}\mathbf{v}_n\end{bmatrix} \\
\mathbf{VD} &= \begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}\lambda_1\mathbf{v}_1 & \lambda_2\mathbf{v}_2 & \cdots & \lambda_n\mathbf{v}_n\end{bmatrix} \\
\mathbf{AV} = \mathbf{VD} &\Leftrightarrow \begin{bmatrix}\mathbf{A}\mathbf{v}_1 & \mathbf{A}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{A}\mathbf{v}_n\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\lambda_1\mathbf{v}_1 & \lambda_2\mathbf{v}_2 & \cdots & \lambda_n\mathbf{v}_n\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{64}
$$

위 공식과 같이

$$
\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1\mathbf{v}_1, \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2\mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{A}\mathbf{v}_n = \lambda_n\mathbf{v}_n \tag{65}
$$

각각의 열이 모두 동일해야 한다. 즉, **벡터 $\mathbf{v}_i$는 행렬 $\mathbf{A}$에 대한 고유벡터가 되어야 하고 스칼라 λ_i는 행렬 $\mathbf{A}$에 대한 고유값이 되어야 한다.** 이에 따라 대각행렬 $\mathbf{D}$는 고유값들을 대각성분으로 포함하고 있는 행렬이 된다. 결론적으로 **정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$가 대각화 가능한가 안한가에 대한 질문은 n개의 고유벡터가 존재하는가 안하는가에 대한 질문과 동치이다.**

50 Eigendecomposition

정방행렬 $\mathbf{A}$가 대각화 가능한 경우 $\mathbf{D} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{AV}$ 공식이 성립한다. 이 공식을 다시 작성하면 다음과 같다.

$$
\mathbf{A} = \mathbf{VDV}^{-1} \tag{66}
$$

이를 행렬 $\mathbf{A}$에 대한 **고유값 분해(Eigendecomposition)**라고 한다. 행렬 $\mathbf{A}$가 대각화 가능하다는 의미는 행렬 $\mathbf{A}$가 고유값 분해 가능하다는 말과 동치이다.

51 Linear Transformation via Eigendecomposition

정방행렬 $\mathbf{A}$가 대각화 가능한 경우 $\mathbf{A} = \mathbf{VDV}^{-1}$과 같이 고유값 분해가 가능하다. 이 때 선형 변환 $T(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$을 생각해보면 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$
T(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} = \mathbf{VDV}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{V}(\mathbf{D}(\mathbf{V}^{-1}\mathbf{x})) \tag{67}
$$

51.1 Change of Basis

예를 들어 $\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = -1\mathbf{v}_1, \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = 2\mathbf{v}_2$가 성립한다고 가정하고 $T(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} = \mathbf{VDV}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{V}(\mathbf{D}(\mathbf{V}^{-1}\mathbf{x}))$에서 $\mathbf{y} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{x}$라고 가정하면

$$
\mathbf{Vy} = \mathbf{x} \tag{68}
$$

의 관계가 성립한다. 이 때, **벡터 $\mathbf{y}$는 벡터 $\mathbf{x}$의 고유벡터 $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$에 대한 새로운 좌표를 의미한다.**

$$
\mathbf{x} = \begin{bmatrix}4 \\ 3\end{bmatrix} = 4\begin{bmatrix}1 \\ 0\end{bmatrix} + 3\begin{bmatrix}0 \\ 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 \\ 3\end{bmatrix} = \mathbf{Vy} = [\mathbf{v}_1 \ \ \mathbf{v}_2]\begin{bmatrix}y_1 \\ y_2\end{bmatrix} = 2\mathbf{v}_1 + 1\mathbf{v}_2 \Rightarrow \mathbf{y} = \begin{bmatrix}2 \\ 1\end{bmatrix} \tag{69}
$$

51.2 Element-wise Scaling

위 과정을 통해 $\mathbf{y}$ 값을 구하고 나면 $T(\mathbf{x}) = \mathbf{V}(\mathbf{D}(\mathbf{V}^{-1}\mathbf{x}))$는 $T(\mathbf{x}) = \mathbf{V}(\mathbf{Dy})$로 표현할 수 있다. 이 때 $\mathbf{z} = \mathbf{Dy}$라고 하면 벡터 $\mathbf{z}$는 단순히 벡터 $\mathbf{y}$를 행렬의 대각 원소의 크기만큼 스케일링한 벡터가 된다.

51.3 Back to Original Basis

위 과정까지 진행했으면 $T(\mathbf{x}) = \mathbf{V}(\mathbf{D}\mathbf{y}) = \mathbf{V}\mathbf{z}$와 같이 나타낼 수 있고 이 때 벡터 $\mathbf{z}$는 여전히 새로운 기저벡터 $\{\mathbf{v}_1' \ \ \mathbf{v}_2'\}$를 기반으로 하면 좌표가 된다. **$\mathbf{Vz}$ 연산은 벡터 $\mathbf{z}$를 다시 원래 기저벡터의 좌표로 변환하는 역할을 한다.** 벡터 $\mathbf{Vz}$는 기존의 기저벡터 $\{\mathbf{v}_1 \ \ \mathbf{v}_2\}$의 선형결합이 된다.

$$\mathbf{V}\mathbf{z} = \begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}z_1 \\ z_2\end{bmatrix} = \mathbf{v}_1 z_1 + \mathbf{v}_2 z_2 \tag{70}$$

지금까지의 과정을 **고유값 분해를 통한 선형 변환**이라고 한다.

52 Linear Transformation via $\mathbf{A}^k$

여러번의 변환이 중첩된 $\mathbf{A} \times \mathbf{A} \times \cdots \times \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^k\mathbf{x}$를 생각해보자. 이 때, 행렬 $\mathbf{A}$가 대각화 가능하다면 $\mathbf{A}$를 고유값 분해할 수 있고 이 때, $\mathbf{A}^k$는 다음과 같이 분해할 수 있다.

$$\mathbf{A}^k = (\mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^{-1})(\mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^{-1})\cdots(\mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^{-1}) = \mathbf{V}\mathbf{D}^k\mathbf{V}^{-1} \tag{71}$$

이 때 $\mathbf{D}^k$는 다음과 같이 표현된다.

$$\mathbf{D}^k = \begin{bmatrix} \lambda_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^k & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n^k \end{bmatrix} \tag{72}$$

53 Geometric Multiplicity and Algebraic Multiplicity

정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$이 있을 때 $\mathbf{A}$가 대각화 가능한지 안한지 판단을 해야하는 경우 일반적으로 판별식을 사용하여 판단한다.

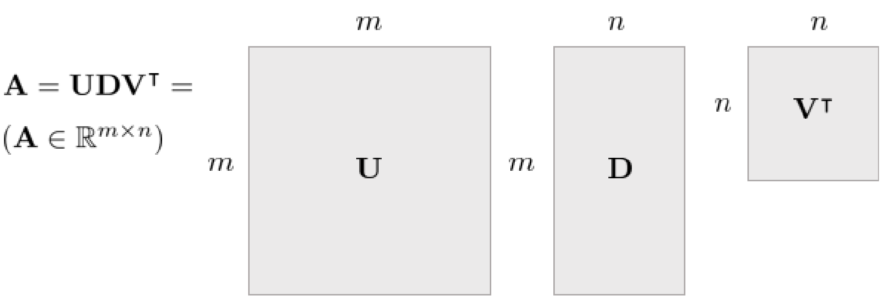
$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0 \tag{73}$$

예를 들어 $n = 5$인 정방행렬 $\mathbf{A}$가 있을 때, $\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$는 5차 다항식이 나오게 된다. 5차 다항식은 일반적으로 5개의 해를 가지고 있지만 실수만 고려하는 경우 5개의 해가 계산되지 않을 수 있다. 즉, **실근이 5개가 나오지 않는 경우 $n = 5$개의 선형독립인 고유벡터가 나오지 않으므로 대각화가 불가능하다.**

만약 실근 중 중근이 포함되는 경우, 예를 들어 $(\lambda-2)^2(\lambda-3) = 0$과 같이 $\lambda = 2$가 중근인 경우, **$\lambda = 2$로 인해 생성되는 고유공간(Eigenspace)의 차원이 최대 $\lambda = 2$가 가지는 중근의 개수까지 가질 수 있다.** 중근이 아닌 일반 실근의 경우 최대 1차원의 고유공간을 가질 수 있다. **즉, 중근이 포함된 경우 고유공간의 차원이 최대 $n = 5$까지 생성될 수 있는데 $n = 5$를 만족하지 못하는 경우에는 대각화가 불가능하다.**

이와 같이 대수적으로 판별식을 인수분해했을 때, 중근이 생기는 경우 중근의 **대수 중복도(Algebraic Multiplicity)**와 이로 인해 Span되는 고유공간의 **기하 중복도(Geometric Multiplicity)**가 일치해야 n개의 독립적인 고유벡터가 생성될 수 있고 행렬 $\mathbf{A}$의 대각화가 가능하다.

54 Singular Value Decomposition



행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$이 주어졌을 때 특이값 분해(Singular Value Decomposition, SVD)는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\intercal \tag{74}$$

이 때, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$인 행렬이며 이들은 각 열이 Col $\mathbf{A}$와 Row $\mathbf{A}$에 의 정규직교기저벡터(Orthonormal Basis)로 구성되어 있다. $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$은 대각행렬이며 대각 성분들이 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)}$ 특이값이며 큰 값부터 내림차순으로 정렬된 행렬이다.

55 SVD as Sum of Outer Products

행렬 $\mathbf{A}$는 다음과 같이 Outer Products의 합으로 표현할 수 있다.

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\intercal = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\intercal, \quad \text{where} \;\; \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \tag{75}$$

이 때 위 식을 다시 행렬로 합성하면 $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m\times m} \rightarrow \mathbf{U}' \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 그리고 $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m\times n} \rightarrow \mathbf{D}' \in \mathbb{R}^{n\times n}$과 같이 행렬 $\mathbf{V}^\intercal$의 차원에 맞게 다시 합성할 수 있는데 이를 **Reduced Form of SVD**이라고 한다.

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}'\mathbf{D}'\mathbf{V}^\intercal \tag{76}$$

56 Another Perspective of SVD

행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$에 대해 Gram-Schmidt Orthogonalization을 사용하면 Col $\mathbf{A}$에 대한 정규직교기저벡터 $\mathbf{u}_1, \cdots, \mathbf{u}_n$와 Row $\mathbf{A}$에 대한 정규직교기저벡터 $\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_n$을 구할 수 있다. 하지만 이렇게 계산한 정규직교기저벡터 $\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i$는 유일하지 않다.

Reduced Form of SVD를 사용하면 행렬 $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}$과 $\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$ 그리고 $\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 일 때

$$\begin{aligned} \mathbf{AV} &= \mathbf{A}\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}\mathbf{v}_1 & \mathbf{A}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{A}\mathbf{v}_n \end{bmatrix} \\ \mathbf{U}\Sigma &= \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix} \\ & \begin{bmatrix} \sigma_1\mathbf{u}_1 & \sigma_2\mathbf{u}_2 & \cdots & \sigma_n\mathbf{u}_n \end{bmatrix} \\ \mathbf{AV} = \mathbf{U}\Sigma &\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{A}\mathbf{v}_1 & \mathbf{A}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{A}\mathbf{v}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1\mathbf{u}_1 & \sigma_2\mathbf{u}_2 & \cdots & \sigma_n\mathbf{u}_n \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{77}$$

위 식을 간결하게 나타내면 다음과 같다.

$$\mathbf{AV} = \mathbf{U}\Sigma \Leftrightarrow \mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\intercal \tag{78}$$

57 Computing SVD

행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$에 대하여 $\mathbf{AA}^\intercal$와 $\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$는 다음과 같이 고유값분해할 수 있다.

$$\begin{aligned} \mathbf{AA}^\intercal &= \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\intercal\mathbf{V}\Sigma^\intercal\mathbf{U}^\intercal = \mathbf{U}\Sigma\Sigma^\intercal\mathbf{U}^\intercal = \mathbf{U}\Sigma^2\mathbf{U}^\intercal \\ \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A} &= \mathbf{V}\Sigma^\intercal\mathbf{U}^\intercal\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\intercal = \mathbf{V}\Sigma^\intercal\Sigma\mathbf{U}^\intercal = \mathbf{V}\Sigma^2\mathbf{V}^\intercal \end{aligned} \tag{79}$$

이 때 계산되는 행렬 $\mathbf{U}, \mathbf{V}$은 직교하는 고유벡터를 각 열의 성분으로 하는 행렬이며 대각행렬 Σ^2의 각 성분은 항상 0보다 큰 양수의 값을 가진다. 그리고 $\mathbf{AA}^\intercal$와 $\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$를 통해 계산되는 Σ^2의 값은 동일하다.

58 Diagonalization of Symmetric Matrices

일반적으로 정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$이 n개의 선형독립인 고유벡터를 가지고 있을 경우 대각화 가능하다. 그리고 **대칭행렬 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \mathbf{S}^\intercal = \mathbf{S}$는 항상 대각화 가능하다.** 추가적으로 **대칭행렬 S의 고유벡터는 항상 서로에게 직교하므로 직교대각화(Orthogonally Diagonalizable)가 가능하다.**

59 Spectral Theorem of Symmetric Matrices

$\mathbf{S}^\intercal = \mathbf{S}$를 만족하는 대칭행렬 $\mathbf{S}$가 주어졌을 때 $\mathbf{S}$는 n개의 중근을 포함한 실수의 고유값이 존재한다. 또한, 고유공간의 차원은 기하 중복도(Algebraic Multiplicity)와 기하 중복도(Geometric Multiplicity)와 같아야 한다. 서로 다른 λ값 들에 대한 고유공간들은 서로 직교한다. 결론적으로 대칭행렬 $\mathbf{S}$은 직교대각화가 가능하다.

60 Spectral Decomposition

대칭행렬 $\mathbf{S}$의 고유값 분해는 **Spectral Decomposition**이라고 불린다. 이는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\intercal &= \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\intercal \\ \mathbf{u}_2^\intercal \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^\intercal \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1\mathbf{u}_1 & \lambda_2\mathbf{u}_2 & \cdots & \lambda_n\mathbf{u}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\intercal \\ \mathbf{u}_2^\intercal \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^\intercal \end{bmatrix} \\
&= \lambda_1\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^\intercal + \lambda_2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^\intercal + \cdots + \lambda_n\mathbf{u}_n\mathbf{u}_n^\intercal
\end{aligned} \tag{80}
$$

위 식에서 각 항 $\lambda_i\mathbf{u}_j\mathbf{u}_j^\intercal$은 $\mathbf{u}_j$에 의해 Span된 부분공간에 프로젝션된 다음 고유값 λ_i만큼 스케일된 벡터로 볼 수 있다.

61 Positive (Semi-)Definite Matrices

정방행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$이 있을 때 0이 아닌 모든 벡터 $\forall \mathbf{x} \neq 0$에 대하여 $\mathbf{x}^\intercal\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$을 만족하는 경우 $\mathbf{A}$를 **Positive Definite** 행렬이라고 한다. 만약 $\mathbf{x}^\intercal\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$인 경우 **Positive Semi-Definite** 행렬이라고 한다.

정방행렬 $\mathbf{A}$가 Postivie Definite인 경우 **A의 고유값은 항상 모두 양수이다.**

62 Symmetric Positive Definite Matrices

행렬 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times n}$이 대칭이면서 Positive Definite인 경우 Spectral Decomposition의 모든 고유값은 항상 양수가 된다.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\intercal &= \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\intercal \\ \mathbf{u}_2^\intercal \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^\intercal \end{bmatrix} \\
&= \lambda_1\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^\intercal + \lambda_2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^\intercal + \cdots + \lambda_n\mathbf{u}_n\mathbf{u}_n^\intercal \\
&\text{where, } \lambda_j > 0, \forall j = 1, \cdots, n
\end{aligned} \tag{81}
$$

63 Back to Computing SVD

행렬 $\mathbf{A}$에 대하여 $\mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal = \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A} = \mathbf{S}$인 대칭행렬이 존재할 때 $\mathbf{S}$가 Positive (Semi-)Definite한 경우

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}^\intercal \mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{x} &= (\mathbf{A}^\intercal \mathbf{x})^\intercal (\mathbf{A}^\intercal \mathbf{x}) = \|\mathbf{A}^\intercal \mathbf{x}\| \geq 0 \\
\mathbf{x}^\intercal \mathbf{A}^\intercal \mathbf{A}\mathbf{x} &= (\mathbf{A}\mathbf{x})^\intercal (\mathbf{A}\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 \geq 0
\end{aligned} \tag{82}
$$

즉, $\mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal = \mathbf{U}\Sigma^2\mathbf{U}^\intercal$와 $\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A} = \mathbf{V}\Sigma^2\mathbf{V}^\intercal$에서 Σ^2의 값은 항상 양수가 된다.

임의의 직각 행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$에 대하여 특이값 분해는 언제나 존재한다. $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 행렬의 경우 고유값 분해가 존재하지 않을 수 있지만 특이값 분해는 항상 존재한다. 대칭이면서 동시에 Positive Definite인 정방 행렬 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n\times n}$은 항상 고유값 분해값이 존재하며 이는 특이값 분해와 동일하다.

64 Eigendecomposition in Machine Learning

일반적으로 머신러닝에서는 대칭이고 Positive Definite인 행렬을 다룬다. 예를 들면, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{10\times 3}$인 행렬이 있고 각 열은 사람을 의미하고 각 행은 Feature를 의미한다고 가정했을 때, **$\mathbf{A}^\intercal\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$는 각 사람들 간 유사도**를 의미하고 **$\mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal \in \mathbb{R}^{10\times 10}$는 각 Feature들의 상관관계를 의미한다.** 이 때, $\mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal$는 주성분분석 (Principal Component Analysis)에서 Covariance Matrix를 구할 때 사용된다.

65 Low Rank Approximation of a Matrix

행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$이 주어졌을 때 예를 들어, $\mathbf{A}$의 원래 rank가 r일 때, 행렬 $\mathbf{A}$에서 rank를 r 이하를 가진 근사행렬 $\hat{\mathbf{A}}$을 찾는 Low Rank Approximation을 수행할 수 있다.

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{A}}_r &= \arg\min_{\hat{\mathbf{A}}_r} \|\mathbf{A} - \mathbf{A}_r\|_F, \quad \text{subject to } \text{rank}\mathbf{A}_r \leq r \\
\hat{\mathbf{A}}_r &= \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\intercal \quad \text{where, } \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r
\end{aligned} \tag{83}
$$

66 Dimension Reducing Transformation

Feature-by-data item 행렬 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$이 주어졌을 때 $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{m\times r}, r < m$인 변환 $\mathbf{G}^\intercal : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \mapsto \mathbf{y} \in \mathbb{R}^r$을 생각해보면

$$
\mathbf{y}_i = \mathbf{G}^\intercal \mathbf{a}_i \tag{84}
$$

가 성립하고 $\mathbf{G}$ 의 각 열들은 정규직교벡터이며 데이터의 유사도 행렬 $\mathbf{S} = \mathbf{A}^\intercal\mathbf{A}$의 유사도를 보존하는 **변환 G를 차원 축소 변환(Dimension-Reducing Transformation)**이라고 한다.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{Y} &= \mathbf{G}^\intercal \mathbf{A} \\
\mathbf{Y}^\intercal \mathbf{Y} &= (\mathbf{G}^\intercal \mathbf{A})^\intercal \mathbf{G}^\intercal \mathbf{A} = \mathbf{A}^\intercal \mathbf{G}\mathbf{G}^\intercal \mathbf{A}
\end{aligned} \tag{85}
$$

이 때 차원축소변환 $\hat{\mathbf{G}}$ 은 다음과 같이 추정할 수 있다.

$$
\hat{\mathbf{G}} = \arg\min_{\mathbf{G}} \|S - \mathbf{A}^\intercal \mathbf{G}\mathbf{G}^\intercal \mathbf{A}\|_F \quad \text{subject to } \mathbf{G}^\intercal\mathbf{G} = \mathbf{I}_k \tag{86}
$$

주어진 행렬 $\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\intercal = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\intercal$에 대하여 최적의 해는 다음과 같다.

$$
\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{U}_r = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_r \end{bmatrix} \tag{87}
$$

67 Derivative of multi-variable function

67.1 Gradient

임의의 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$에 대하여 $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$를 만족하는 다변수 스칼라 함수 $f(\mathbf{x})$가 주어졌다고 하자.

$$
f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R} \tag{88}
$$

$f(\mathbf{x})$에 대한 1차 편미분은 벡터가 되고 이는 그레디언트(gradient)라고 불린다.

$$
\boxed{\nabla \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{1\times n}} \tag{89}
$$

67.2 Jacobian matrix

임의의 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$에 대하여 $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^m$를 만족하는 다변수 벡터 함수 $f(\mathbf{x})$가 주어졌다고 하자.

$$f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m \tag{90}$$

이 때, $f(\cdot)$의 1차 편미분은 행렬이 되고 이를 특별히 자코비안(jacobian) 행렬이라고 한다.

$$\boxed{\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}} \tag{91}$$

이를 통해 자코비안 행렬의 각 행벡터(row vector)는 함수 $f_m(\cdot)$에 대한 그레디언트라는 것을 알 수 있다. . 위 식을 미소변화량 $\mathbf{h}$를 사용하여 나타내면 다음과 같다.

$$\mathbf{J} = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \triangleq \lim_{\mathbf{h} \to \mathbf{0}} \frac{f(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - f(\mathbf{x})}{\mathbf{h}} \in \mathbb{R}^{m \times n} \tag{92}$$

SLAM에서 자코비안은 에러 $\mathbf{e}(\mathbf{x})$를 최적화할 때 사용된다. **SLAM에서 최적화하고자 하는 에러는 일반적으로 비선형 함수로 구성되어 있으며 크기가 작기 때문에 에러의 변화량 $\mathrm{e}(\mathrm{x}+\Delta\mathrm{x})$를 그대로 사용하지 않고 테일러 전개하여 근사식 $\mathrm{e}(\mathrm{x}) + \mathbf{J}\Delta\mathrm{x}$으로 표현하게 되는데 이 때 에러에 대한 자코비안 $\mathbf{J}$가 유도된다.** 그리고 근사식을 바탕으로 유도한 에러의 최적 증분량 $\Delta\mathbf{x}^* = (\mathbf{J}^\intercal\mathbf{J})^{-1}\mathbf{J}^\intercal\mathbf{b}$이 자코비안을 통해 구해지기 때문에 SLAM에서는 자코비안이 필수적으로 사용된다. 자세한 내용은 [SLAM] Errors and Jacobian Derivations for SLAM 정리 포스트를 참조하면 된다.

67.2.1 Toy example

예를 들어 다음과 같은 3개의 연립 방정식이 주어졌다고 하자.

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} f_1(\mathbf{x}) = ax^2 + 2bx + cy \\ f_2(\mathbf{x}) = dx^3 + ex \\ f_3(\mathbf{x}) = fx + gy^2 + hy \end{cases} \tag{93}$$

$\mathbf{x} = (x, y)$를 의미한다. 위 함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$f : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^3 \tag{94}$$

자코비안의 정의에 따라 이를 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2ax + 2b & c \\ 3dx^2 + e & 0 \\ f & 2gy + h \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2} \tag{95}$$

67.3 Hessian matrix

임의의 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$에 대하여 $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$를 만족하는 다변수 스칼라 함수 $f(\mathbf{x})$가 주어졌다고 하자.

$$f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R} \tag{96}$$

이 때, $f(\cdot)$의 2차 편미분은 행렬이 되고 이를 특별히 헤시안(hessian) 행렬이라고 한다. 헤시안 행렬은 일반적으로 대칭행렬의 형태를 띄고 있으며 다변수 벡터 함수가 아닌 다변수 스칼라 함수에 대한 2차 미분임에 유의한다.

$$\boxed{\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}} \tag{97}$$

67.4 Laplacian

임의의 벡터 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$에 대하여 $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$를 만족하는 다변수 스칼라 함수 $f(\mathbf{x})$가 주어졌다고 하자.

$$f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R} \tag{98}$$

$f(\mathbf{x})$에 대한 라플라시안(laplacian)은 각 입력 벡터에 따른 2차 편미분의 합으로 정의된다.

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{f} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} + \cdots + \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \in \mathbb{R}^{1\times n}} \tag{99}$$

67.5 Taylor expansion

테일러 전개(expansion)은 미지의 함수 $f(x)$를 $x = a$ 지점에서 근사 다항함수로 표현하는 방법을 말한다. 이는 테일러 급수(series) 또는 테일러 근사(approximation)이라고도 불린다. $f(\cdot)$을 $x = a$ 부근에서 테일러 전개를 수행하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$f(x)|_{x=a} = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{1}{2!}f''(a)(x-a)^2 + \frac{1}{3!}f'''(a)(x-a)^3 + \cdots \tag{100}$$

함수 $f(\cdot)$가 다변수 스칼라 함수일 경우 $\mathbf{x} = \mathbf{a}$ 지점에서 테일러 전개는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$f(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=\mathbf{a}} = f(\mathbf{a}) + \nabla\mathbf{f}(\mathbf{x}-\mathbf{a}) + \frac{1}{2!}(\mathbf{x}-\mathbf{a})^\intercal\mathbf{H}(\mathbf{x}-\mathbf{a}) + \cdots \tag{101}$$

이 때, $\nabla\mathbf{f}$는 함수 $f(\cdot)$의 그레디언트(gradient) 의미하며 $\mathbf{H}$는 헤시안(hessian) 행렬을 의마한다.

68 Reference

1. edwith 인공지능을 위한 선형대수, 주재걸 교수
2. 다크프로그래머 - Gradient, Jacobian 행렬, Hessian 행렬, Laplacian

69 Revision log

- 1st: 2020-05-15
- 2nd: 2020-06-21
- 3rd: 2023-01-21
- 4th: 2023-01-31